

---

Preprint No. M 00/29

**Simultane linear-implizite  
Einschrittverfahren für große DGL-  
Systeme**

Vogt, Werner; Schilder, Frank

Dezember 2000

**Impressum:**

Hrsg.: Leiter des Instituts für Mathematik  
Weimarer Straße 25  
98693 Ilmenau

Tel.: +49 3677 69 3621

Fax: +49 3677 69 3270

<http://www.tu-ilmenau.de/ifm/>

ISSN xxxx-xxxx

ilmedia

# Simultane linear-implizite Einschrittverfahren für große DGL-Systeme

Werner Vogt und Frank Schilder  
Technische Universität Ilmenau  
Institut für Mathematik  
Postfach 100565  
98684 Ilmenau

Ilmenau, den 09.12.2000

**Zusammenfassung** Zur Lösung von Randwert- und Bifurkationsproblemen ist häufig eine simultane Integration benachbarter Anfangswertaufgaben mit „gestörten“ Anfangswerten erforderlich, z.B. um eine Monodromiematrix bzw. die Newtonmatrix bei Schießverfahren oder Mehrfachschießverfahren zu approximieren. So treten neben der originalen Anfangswertaufgabe mit  $n$  Gleichungen weitere  $n$  große Systeme mit abweichenden Anfangswerten auf, deren Integration bei Steifheit der Systeme infolge Semidiskretisierung für  $n > 100$  extrem zeitaufwendig ist. Benutzt man die zur Integration erforderlichen Jacobimatrizen und die LU-Zerlegungen auch zur Integration der benachbarten  $n$  Aufgaben, so läßt sich eine beträchtliche Aufwandsreduktion erzielen. Da jedoch nicht vorausgesetzt werden kann, daß die Störungen der Anfangswerte von der Integrationsschrittweite  $h$  abhängen, sind diese Verfahren als W-Methoden zu untersuchen.

Insbesondere werden Konsistenz und Konvergenz des simultanen linear-impliziten Eulerverfahrens (SLIE) und darauf basierender Extrapolation beliebiger Ordnung nachgewiesen sowie Stabilitätseigenschaften aufgezeigt. Numerische Experimente und Aufwandsbetrachtungen belegen eine wesentliche Effizienzsteigerung bei großdimensionalen Randwertproblemen.

**AMS(MOS)-Klassifikation: 65L05, 65L06**

## 1 Einleitung

Betrachtet wird die autonome Anfangswertaufgabe

$$y' = f(y), \quad y(a) = y_0, \quad t \in I = [a, b] \quad (1)$$

mit  $y_0 \in D \subset \mathbb{R}^n$ ,  $f : D \rightarrow \mathbb{R}^n$  auf einem endlichen Intervall  $I$ . Nichtautonome Aufgaben können durch Einführung der Funktion  $y_{n+1}(t) = t$  unmittelbar in die Form (1) überführt werden, allerdings nun in  $\mathbb{R}^{n+1}$ .

Zur Lösung von Randwert-, Schwingungs- und Bifurkationsproblemen ist häufig eine simultane Integration benachbarter Anfangswertaufgaben

$$z' = f(z), \quad z(a) = z_0 = y_0 + \delta, \quad \|\delta\| < \varepsilon \quad (2)$$

mit „gestörten“ Anfangswerten  $z_0 \in D$  erforderlich, z. B. um eine Monodromiematrix bzw. die Newtonmatrix bei Schießverfahren (oder Mehrfachschießverfahren) zu approximieren. So treten neben der Anfangswertaufgabe (1) große Systeme mit  $n$  zusätzlichen Anfangswertaufgaben der Form (2) auf, deren Integration bei Steifheit der Systeme sehr zeitaufwendig ist. Die dann erforderlichen impliziten Ein- oder Mehrschrittverfahren benötigen in (fast) jedem Integrationsschritt eine Approximation der Jacobimatrizen  $f'(y)$  und  $f'(z)$ , also von  $n + 1$  Matrizen der Dimension  $n$ . So entstehen - auch wenn schnelle Standardlöser genutzt werden - bereits bei Dimensionen  $n < 100$  erhebliche Rechenzeiten, zumal zur Lösung der Randwertaufgabe im allgemeinen mehrere Newtonschritte erforderlich sind. Bei

Parameterfortsetzung der Lösung multipliziert sich dieser Aufwand zusätzlich mit der Zahl der Fortsetzungsschritte.

Eine Idee zur Reduktion des Aufwandes der impliziten Verfahren besteht nun darin, die zur Integration von (1) erforderlichen Jacobimatrizen  $f'(y)$  auch zur Integration der benachbarten  $n$  Aufgaben des Typs (2) zu benutzen. Dabei *kann nicht vorausgesetzt werden*, daß die Störungen  $\delta$  der Anfangswerte von (2) von einer Integrationsschrittweite  $h$  abhängen und  $\lim_{h \rightarrow 0} \delta = 0$  gilt. Vielmehr sind alle Störungen  $\delta$  als konstant und im allgemeinen auch unabhängig von Integrationsschrittweiten vorzusetzen.

Der Einfachheit halber werden nachfolgend äquidistante Gitter

$$I_h = \{t_i \mid t_0 = a, t_N = b, t_i = a + ih, i = 0(1)N, h = (b - a)/N\} \quad (3)$$

angenommen, auf denen Näherungslösungen  $y_i \sim y(t_i)$ ,  $z_i \sim z(t_i)$  gewonnen werden sollen. Dann läßt sich z. B. das linear-implizite Eulerverfahren für (1)

$$(I - hf'(y_i))(y_{i+1} - y_i) = hf(y_i) \quad (4)$$

mit der Verfahrensvorschrift für die benachbarten Aufgaben des Typs (2)

$$(I - hf'(y_i))(z_{i+1} - z_i) = hf(z_i) \quad (5)$$

koppeln. In jedem Integrationsschritt ist nun nur eine einzige Berechnung bzw. Approximation der Jacobimatrix  $f'(y_i)$  und eine einzige LU-Zerlegung der Matrix  $E_i = I - hf'(y_i)$  durchzuführen, wogegen bei getrennter Behandlung  $n + 1$  Zerlegungen nötig wären! Derartige Verfahren sollen desweiteren als *simultan* bezeichnet werden. In Abschnitt 2 werden Konsistenz und Konvergenz des simultanen linear-impliziten Eulerverfahrens (SLIE) nachgewiesen sowie Stabilitätseigenschaften aufgezeigt.

Um zu linear-impliziten Verfahren höherer Ordnung zu gelangen, sind 2 Zugänge denkbar: Einerseits lassen sich geeignete W-Methoden (vgl. [9]) konstruieren, für die die Konsistenzbedingungen zu erfüllen sind. Da in W-Methoden die Jacobimatrix  $f'(y_i)$  durch eine beliebige Matrix  $A_i$  ersetzt werden kann - womit auch unsere Approximation (5) erfaßt wäre - nimmt die Anzahl der Ordnungsbedingungen exponentiell zu. So sind für die Ordnung  $p = 4$  bereits 21 Bedingungen zu erfüllen (vgl. [5], S. 126). Könnte man für die Anfangsstörungen  $\delta$  der benachbarten Probleme (2) eine Ordnungsbeziehung  $\delta = O(h)$  voraussetzen, so wäre eine Abweichung  $f'(z_i) - f'(y_i) = O(h)$  denkbar, womit sich die Zahl der Ordnungsbeziehungen der W-Methoden reduzieren ließe (vgl. [6]). Bedenkt man zudem, daß die „Stabilitätsuntersuchung für linear-implizite Verfahren mit  $A_i \neq f'(y_i)$  sehr kompliziert ist“ (vgl. [5], S. 126), so ist dieser Zugang zu verwerfen. Im übrigen sei betont, daß eine naive Anwendung von ROW-Verfahren höherer Ordnung mit ein- und derselben Matrix  $E_i = I - \gamma hf'(y_i)$  für beide Systeme (1), (2) lediglich zu Verfahren

der Ordnung  $O(h)$  für die benachbarten Aufgaben (2) führen wird! Wird zur Lösung der Randwertaufgaben nur eine grobe Approximation der Newton-Matrix benötigt, so wäre dies durchaus sinnvoll. Nur wäre dann stets das linear-implizite Euler-Verfahren für die benachbarten Probleme (2) sinnvoller als die aufwendigeren ROW-Verfahren höherer Ordnung.

Alternativ zu diesem Zugang läßt sich durch *Extrapolation*, basierend auf dem linear-impliziten Eulerverfahren, die Ordnung theoretisch beliebig erhöhen, allerdings nur in Schritten  $h, h^2, h^3, h^4, \dots$ . Diese offenbar auf Deuffhard [3] zurückgehende Idee vermeidet die aufwendige Lösung der Konsistenzgleichungen und erzeugt Verfahren, die gute  $A(\alpha)$ -Stabilitäten besitzen (vgl. [5], S. 151), und die sich zudem leicht verifizieren lassen. Im übrigen können diese Verfahren auch als W-Methoden interpretiert werden (so wie auch die extrapolierte linear-implizite Mittelpunktregele). In Abschnitt 3 werden die erforderlichen Voraussetzungen für die Anwendung der Extrapolation bereitgestellt.

Anhand numerischer Experimente und Effizienzbetrachtungen wird in Abschnitt 4 nachgewiesen, daß die vorgestellten simultanen Extrapolationsverfahren für große Randwertprobleme eine extreme Effizienzsteigerung bedeuten können.

## 2 Das simultane linear-implizite Eulerverfahren

Da die Verfahren (4) und (5) nur gemeinsam untersucht werden können, empfiehlt sich eine gekoppelte Betrachtung der Anfangswertaufgaben (1) und (2). (In Anwendungen bei Randwertproblemen besteht (2) aus  $n$  Anfangswertaufgaben mit Störungen  $\delta_j, j = 1(1)n$ . Für die nachfolgenden Betrachtungen genügt 1 Exemplar der benachbarten Probleme; alle Ergebnisse lassen sich auf den allgemeinen Fall übertragen.)

Das simultane System

$$\begin{aligned} y' &= f(y), & y(a) &= y_0 \\ z' &= f(z), & z(a) &= y_0 + \delta = z_0 \end{aligned} \tag{6}$$

läßt sich mittels der Vektornotation

$$x = \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2n}, \quad x_0 = \begin{pmatrix} y_0 \\ z_0 \end{pmatrix}, \quad F(x) = \begin{pmatrix} f(y) \\ f(z) \end{pmatrix}$$

in der Form

$$x' = F(x), \quad x(a) = x_0 \tag{7}$$

notieren. Die Norm für  $x$  sei durch

$$\|x\| = \max\{\|y\|, \|z\|\}$$

definiert. Das SLIE-Verfahren lautet nun

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h[I - hf'(y_i)]^{-1}f(y_i) \\ z_{i+1} &= z_i + h[I - hf'(y_i)]^{-1}f(z_i) \end{aligned} \quad (8)$$

mit  $i = 0(1)N - 1$ . Die Verfahrensfunktionen der beiden Komponenten ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \varphi(y, z, h) &= [I - hf'(y)]^{-1}f(y) \\ \psi(y, z, h) &= [I - hf'(y)]^{-1}f(z). \end{aligned} \quad (9)$$

Durch Zusammenfassung läßt sich das SLIE-Verfahren ebenfalls kompakt in der Form

$$x_{i+1} = x_i + h \cdot \Phi(x_i, h), \quad i = 0(1)N - 1 \quad (10)$$

notieren, wobei

$$x_i = \begin{pmatrix} y_i \\ z_i \end{pmatrix}, \quad \Phi(x, h) = \begin{pmatrix} \varphi(y, z, h) \\ \psi(y, z, h) \end{pmatrix}$$

gilt. Folgende Voraussetzungen - die sich teilweise abschwächen lassen - sollten zugrunde gelegt werden:

**Voraussetzung 1** Zu gegebenem  $y_0 \in D$  und  $\varepsilon > 0$  besitzt die Anfangswertaufgabe

$$y' = f(y), \quad y(a) = y_0 + \delta \quad (11)$$

für alle  $\delta$  mit  $\|\delta\| < \varepsilon$  in  $I = [a, b]$  eine eindeutige Lösung  $y \in C^1(I)$ .

**Folgerung 1** Zu  $\varepsilon > 0$  existiert eine Konstante  $M > 0$ , so daß für jede Lösung

$$y(t) \in \text{int}(S), \quad S = \{y \mid \|y\| \leq M\}$$

mit  $t \in I$  gilt.

**Voraussetzung 2**  $f \in C^{r+1}(S)$  für  $r \geq 1$ .

**Folgerung 2** Es existieren die Konstanten

$$\begin{aligned} L_0 &= \max_{y \in S} \|f(y)\| \\ L_1 &= \max_{y \in S} \|f'(y)\|, \end{aligned} \quad (12)$$

und für die Lösung  $y$  gilt  $y \in C^{r+2}(I)$ , sowie

$$\|y''(t)\| = \|f'(y(t)) \cdot f(y(t))\| \leq L_0 \cdot L_1 \quad \text{für } t \in I. \quad (13)$$

Die Konsistenz für (8) läßt sich nun durch Taylorabgleich des lokalen Diskretisierungsfehlers

$$\tau_{i+1} = \frac{1}{h}\{x(t_{i+1}) - x(t_i)\} - \Phi(x(t_i), h)$$

nachweisen. Für die 1. Lösungskomponente gilt:

$$\begin{aligned} \tau_{i+1}^y &= \frac{1}{h}\{y(t_{i+1}) - y(t_i)\} - [I - hf'(y(t_i))]^{-1}f(y(t_i)) \\ &= y'(t_i) + h \int_0^1 (1 - \theta)y''(t_i + \theta h)d\theta - E_i^{-1}y'(t_i) \\ &= -hE_i^{-1}f'(y(t_i)) \cdot y'(t_i) + h \int_0^1 (1 - \theta)y''(t_i + \theta h)d\theta \end{aligned} \quad (14)$$

mit  $E_i = I - hf'(y(t_i))$ . Sei  $h_0 := 1/(2L_1)$ , falls  $L_1 > 0$  ist; ansonsten  $h_0 := b - a$ . Für alle  $h \in (0, h_0]$  gilt dann

$$\|hf'(y(t_i))\| \leq h \cdot L_1 \leq h_0 L_1 = \frac{1}{2} < 1.$$

Mit dem Störungslemma ist dann die Matrix  $E_i$  regulär mit Norm

$$\|E_i^{-1}\| = \|I - hf'(y(t_i))\| \leq \frac{1}{1 - \frac{1}{2}} = 2.$$

Damit erhält man die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|\tau_{i+1}^y\| &\leq h \cdot \|E_i^{-1}\| \cdot \|f'(y(t_i))\| \cdot \|f(y(t_i))\| + h \int_0^1 (1 - \theta)\|y''(t_i + \theta h)\|d\theta \\ &\leq h \cdot 2 \cdot L_1 L_0 + h \int_0^1 (1 - \theta) \cdot L_0 L_1 d\theta \end{aligned}$$

nach (12) und (13), d.h.

$$\|\tau_{i+1}^y\| \leq \frac{5}{2}L_0 L_1 h = Q \cdot h, \quad i = 0(1)N - 1. \quad (15)$$

Analoges Vorgehen bei der 2. Lösungskomponente ergibt für den lokalen Fehler

$$\tau_{i+1}^z = z'(t_i) + h \int_0^1 (1 - \theta)z''(t_i + \theta h)d\theta - E_i^{-1} \cdot z'(t_i)$$

mit  $E_i$  gemäß (14). Da die Konstanten  $L_0, L_1$  auch für  $z(t)$  gelten, erhält man

$$\begin{aligned} \|\tau_{i+1}^z\| &\leq h \cdot \|E_i^{-1}\| \cdot \|f'(y(t_i))\| \cdot \|f(z(t_i))\| + h \int_0^1 (1-\theta) \|z''(t_i + \theta h)\| d\theta \quad (16) \\ &\leq h \cdot 2 \cdot L_1 L_0 + h \int_0^1 (1-\theta) \cdot L_0 L_1 d\theta \\ \|\tau_{i+1}^z\| &\leq \frac{5}{2} L_0 L_1 h = Q \cdot h, \quad i = 0(1)N-1. \end{aligned}$$

Aus (15), (16) folgt damit die Konsistenz gemäß

$$\|\tau_i\| = \max\{\|\tau_i^y\|, \|\tau_i^z\|\} \leq Q \cdot h, \quad i = 1(1)N \quad (17)$$

und liefert

**Satz 1** *Es gelten Voraussetzungen 1, 2 mit  $r = 1$ . Mit  $h_0 := \frac{1}{2L_1}$  und einer Konstanten  $Q > 0$  gilt für alle  $h \in (0, h_0]$  die Konsistenzbedingung (17), d.h.  $\tau_i = O(h)$ .*

Um die Konvergenz des SLIE-Verfahrens zu verifizieren, genügt es nachzuweisen, daß  $\Phi(x, h)$  Lipschitz-stetig bezüglich  $x$  und stetig bezüglich  $h$  auf der Menge  $S \times [0, h_0]$  ist (vgl. [10], S. 35). Nachfolgend wird gezeigt, daß  $\frac{\partial \Phi}{\partial x}$  und  $\Phi$  stetig auf  $S \times [0, h_0]$  sind.

**Lemma 1**  *$\Phi(x, h)$  und  $\frac{\partial \Phi}{\partial x}(x, h)$  sind stetige Funktionen auf  $S \times [0, h_0]$  mit  $h_0 = \frac{1}{2L_1}$ .*

$$\text{Beweis:} \quad \text{Wegen} \quad \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi}{\partial y} & \frac{\partial \varphi}{\partial z} \\ \frac{\partial \psi}{\partial y} & \frac{\partial \psi}{\partial z} \end{pmatrix}$$

werden für  $k = 1(1)n$  die Ableitungen gebildet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial y_k} &= [I - h f'(y)]^{-1} \left\{ \frac{\partial f(y)}{\partial y_k} + h \frac{\partial}{\partial y_k} (f'(y)) \cdot \varphi(y, z, h) \right\} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z_k} &= 0 \\ \frac{\partial \psi}{\partial y_k} &= h [I - h f'(g)]^{-1} \frac{\partial}{\partial y_k} (f'(y)) \cdot \psi(y, z, h) \\ \frac{\partial \psi}{\partial z_k} &= [I - h f'(y)]^{-1} \frac{\partial f(z)}{\partial z_k}. \end{aligned}$$



Weiterhin ist

$$\begin{aligned}\varphi &= [I - hf'(y)]^{-1}f(y) \quad \text{und} \\ \psi &= [I - hf'(y)]^{-1}f(z).\end{aligned}$$

Wegen Voraussetzung 2 ist  $f \in C^2(S)$ , womit die angegebenen Funktionen existieren und stetig sind, falls  $E := I - hf'(y)$  regulär ist. Analog zu obiger Betrachtung ist aber

$$\|hf'(y)\| \leq h \cdot L_1 \leq h_0 \cdot L_1 = \frac{1}{2} < 1,$$

womit nach dem Störungslemma die Regularität von  $E$  folgt.  $\square$

Wegen des Lemmas existiert eine Lipschitz-Konstante  $L > 0$ , so daß

$$\max_{(x,h) \in S \times [0,h_0]} \left\| \frac{\partial \Phi(x,h)}{\partial x} \right\| = L \quad (18)$$

gilt. Damit läßt sich Satz 2.2.1 aus [10] anwenden und folgender Konvergenzsatz formulieren:

**Satz 2** *Voraussetzungen 1 und 2 seien erfüllt, und die Anfangsfehler verschwinden, d. h.  $y_0 = y(a)$  und  $z_0 = z(a)$ . Dann gilt für alle  $h \in (0, h_0]$  mit  $h_0 = \frac{1}{2L_1}$ : Das SLIE-Verfahren konvergiert mit Ordnung 1, d. h. es existiert eine Konstante  $C > 0$  mit*

$$\left. \begin{aligned} \|y_i - y(t_i)\| &\leq C \cdot h \\ \|z_i - z(t_i)\| &\leq C \cdot h \end{aligned} \right\} \quad i = 1(1)N. \quad \square$$

Der Stabilitätsbereich des SLIE-Verfahrens unterscheidet sich nicht von dem des impliziten Euler-Verfahrens, denn die Anwendung des Verfahrens auf die lineare Testgleichung  $y' = \lambda y$  bzw.  $z' = \lambda z$  liefert wegen  $f'(y) = \lambda$  in beiden Komponenten mit  $\zeta = h\lambda$

$$y_{i+1} = \frac{1}{1-\zeta} \cdot y_i, \quad z_{i+1} = \frac{1}{1-\zeta} \cdot z_i, \quad i = 0(1)N-1.$$

Beide Komponenten besitzen die Stabilitätsfunktion  $R(\zeta) = \frac{1}{1-\zeta}$  des impliziten Eulerverfahrens, damit auch deren Stabilitätsbereich und sind somit L-stabil.

### 3 Extrapolation des Basisverfahrens

Wir betrachten das simultane System (6) bzw. (7) und suchen Näherungslösungen auf einem äquidistanten Punktgitter

$$I_h = \{t_0, t_1, \dots, t_N\} \quad \text{mit} \quad t_i = a + ih, \quad i = 0(1)N, \quad \text{und} \quad t_N = b, \quad h = \frac{b-a}{N}.$$

Falls  $t_N$  nicht benötigt wird, so soll das reduzierte Gitter mit  $I'_h = I_h \setminus \{t_N\}$  bezeichnet werden.

Gesucht ist eine Gitterfunktion

$$x_h(t) = \begin{pmatrix} y_h(t) \\ z_h(t) \end{pmatrix} : I_h \longrightarrow \mathbb{R}^{2n} \quad (19)$$

mittels des Einschrittverfahrens (10), das nachfolgend mit der eingeführten Gitterfunktion in der Form

$$\begin{aligned} x_h(t+h) &= x_h(t) + h\Phi(x_h(t), h), \\ x_h(t_0) &= x_0, \quad t \in I'_h \end{aligned} \quad (20)$$

dargestellt werden kann. Komponentenweise lautet das Verfahren

$$\begin{aligned} y_h(t+h) &= y_h(t) + h\varphi(y_h(t), z_h(t), h) \\ y_h(t_0) &= y_0 \\ z_h(t+h) &= z_h(t) + h\psi(y_h(t), z_h(t), h) \\ z_h(t_0) &= z_0, \quad t \in I'_h. \end{aligned} \quad (21)$$

Grundlage für die Anwendung von Extrapolationsverfahren ist die Existenz asymptotischer  $h$ -Entwicklungen des lokalen und des globalen Diskretisierungsfehlers. Für den lokalen Diskretisierungsfehler beweist man

**Satz 3** *Mit  $h_0 = \frac{1}{2L_1}$  aus Satz 1 existiert eine asymptotische Entwicklung des lokalen Diskretisierungsfehlers*

$$\tau_h(t) = d_1(t)h + d_2(t)h^2 + \dots + d_{r-1}(t)h^{r-1} + O(h^r), \quad (22)$$

für alle  $t \in I'_h$ ,  $h \in [0, h_0]$ ,  $h \rightarrow 0$ , mit den von  $h$  unabhängigen  $d_i(t)$ .

*Beweis:* Der lokale Fehler von (20) lautet

$$\tau_h(t) = \frac{1}{h} \{x(t+h) - x(t)\} - \Phi(x(t), h) \quad (23)$$

mit der exakten Lösung  $x(t) = (y(t), z(t))^\top$  von (7). Wegen Voraussetzung 2 ist  $x \in C^{r+2}(I)$ . In der 1. Komponente von  $\tau(t)$  ergibt sich auf dem Gitter  $I'_h$ :

$$\begin{aligned} \tau_h^y(t) &= \frac{1}{h} \{y(t+h) - y(t)\} - \varphi(y(t), z(t), h) \\ &= \frac{1}{h} \{y(t) + hy'(t) + \frac{h^2}{2!}y''(t) + \dots + \frac{h^r}{r!}y^{(r)}(t) \\ &\quad + O(h^{r+1}) - y(t)\} - [I - hf'(y(t))]^{-1}f(y(t)) \\ &= y'(t) + \frac{h}{2!}y''(t) + \dots + \frac{h^{r-1}}{r!}y^{(r)}(t) \\ &\quad - [I - hf'(y(t))]^{-1}y'(t) + O(h^r). \end{aligned}$$

Sei  $A(t) := f'(y(t))$ . Wegen  $h \leq h_0$  ist analog zu obigen Betrachtungen die Matrix  $I - hA(t)$  regulär, und es gilt die konvergente Matrixreihendarstellung

$$[I - hA(t)]^{-1} = I + hA(t) + h^2 A(t)^2 + h^3 A(t)^3 + \dots$$

Einsetzen in  $\tau^y(t)$  und Zusammenfassung liefert

$$\begin{aligned} \tau_h^y(t) &= \left[ \frac{1}{2!} y''(t) - A(t) y'(t) \right] \cdot h \\ &\quad + \left[ \frac{1}{3!} y'''(t) - A(t)^2 y'(t) \right] \cdot h^2 \\ &\quad + \dots \\ &\quad + \left[ \frac{1}{r!} y^{(r)}(t) - A(t)^r y'(t) \right] \cdot h^{r-1} + O(h^r). \end{aligned} \tag{24}$$

Für die 2. Komponente erhält man analog

$$\begin{aligned} \tau_h^z(t) &= \frac{1}{h} \{ z(t+h) - z(t) \} - \psi(y(t), z(t), h) \\ &= \frac{1}{h} \left\{ h z'(t) + \frac{h^2}{2!} z''(t) + \dots + \frac{h^r}{r!} z^{(r)}(t) + O(h^{r+1}) \right\} \\ &\quad - [I - h f'(y(t))]^{-1} f(z(t)) \\ &= z'(t) + \frac{h}{2!} z''(t) + \dots + \frac{h^{r-1}}{r!} z^{(r)}(t) \\ &\quad - [I - hA(t)]^{-1} z'(t) + O(h^r), \end{aligned}$$

womit sich die Darstellung

$$\begin{aligned} \tau_h^z(t) &= \left[ \frac{1}{2!} z''(t) - A(t) z'(t) \right] \cdot h \\ &\quad + \left[ \frac{1}{3!} z'''(t) - A(t)^2 z'(t) \right] \cdot h^2 \\ &\quad + \dots \\ &\quad + \left[ \frac{1}{r!} z^{(r)}(t) - A(t)^r z'(t) \right] \cdot h^{r-1} + O(h^r) \end{aligned} \tag{25}$$

ergibt. Zusammenfassung von (24) und (25) liefert die Behauptung (22) mit den Gitterfunktionen

$$d_k(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{(k+1)!} y^{(k+1)}(t) & - & A(t)^k \cdot y'(t) \\ \frac{1}{(k+1)!} z^{(k+1)}(t) & - & A(t)^k \cdot z'(t) \end{pmatrix}, \quad A(t) = f'(y(t)). \quad \square$$

Während eines Extrapolationsschrittes im Intervall  $[t_i, t_i + h]$  sind allerdings mehrere Einzelschritte mit dem SLIE-Verfahren auszuführen. Nach Formel (20) müßte in jedem derartigen Einzelschritt der Länge  $h_j$  die LU-Zerlegung wegen der Darstellung (9) mit

$$E_{i,j} = I - h_j f'(y_{i,j})$$

neu berechnet werden. Wir werden deshalb Satz 3 verallgemeinern und führen eine Matrixfunktion  $A(t)$  mit folgender Voraussetzung ein:

**Voraussetzung 3**

Sei  $A : I \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$  mit  $A \in C^r(I)$  und  $\|A(t) - f'(y(t))\| \leq \rho$  für alle  $t \in I$ .

*Bemerkungen:* Eine Konstante  $\rho > 0$  läßt sich wegen

$$\begin{aligned} \|A(t) - f'(y(t))\| &\leq \|A(t)\| + \|f'(y(t))\| \\ &\leq \max_{t \in I} \|A(t)\| + L_1 =: \rho \end{aligned}$$

unter den Voraussetzungen 1,2 und 3 stets angeben. Natürlich soll  $A(t)$  die Jacobimatrix  $f'(y(t))$  möglichst gut approximieren, d.h.  $\rho$  soll klein sein. Das erreicht man z. B. durch Differenzenapproximation von  $f'(y(t))$  oder/und durch Approximation der Jacobimatrix durch diejenige eines vorhergehenden Schrittes. Ist z. B.  $A(t) := f'(y(t + \alpha \cdot h))$  mit  $\alpha \in \mathbb{R}$  und  $t + \alpha h \in I$ , so erhält man hiermit wegen der Lipschitz-Stetigkeit von  $f$

$$\begin{aligned} \|A(t) - f'(y(t))\| &= \|f'(y(t + \alpha h)) - f'(y(t))\| \\ &= L_2 \cdot \|y(t + \alpha h) - y(t)\| \\ &= L_2 \cdot \left\| \int_0^1 y'(t + \theta \alpha h) d\theta \right\| \cdot |\alpha h| \\ &= L_2 \cdot L_0 \cdot |\alpha| \cdot (b - a) =: \rho, \end{aligned}$$

für alle  $t \in I$  mit  $t + \alpha h \in I$ . Damit verallgemeinert man Satz 3 zu

**Satz 4** *Unter den Voraussetzungen 1,2 und 3 existiert ein  $h_1 > 0$ , so daß für alle  $h \in [0, h_1]$  eine asymptotische Entwicklung (22) des lokalen Fehlers  $\tau_h$  existiert, falls in der Verfahrensfunktion  $f'(y(t))$  durch  $A(t)$  ersetzt wird.*

*Beweis:* Setzt man anstelle  $f'(y(t))$  die Matrix  $A(t)$ , so verläuft der Beweis identisch mit dem des Satzes 3. Es ist nun allerdings zu zeigen, daß die Matrix  $I - hA(t)$

regulär für alle  $t \in I'_h$  ist. Sei dazu  $h_1 := \min\{\frac{1}{4L_1}, \frac{1}{4\rho}\}$  mit obigen Konstanten  $L_1$  und  $\rho$ . Dann gilt für  $h \in [0, h_1]$  und  $t \in I'_h$  nach Voraussetzung 3

$$\begin{aligned}\|hA(t)\| &= \|h[A(t) - f'(y(t))] + hf'(y(t))\| \\ &\leq h\rho + h \cdot L_1 \\ &\leq h_1\rho + h_1 \cdot L_1 \leq \frac{1}{2} < 1,\end{aligned}$$

womit die Regularität folgt sowie die Konvergenz der Matrizenreihe

$$[I - hA(t)]^{-1} = I + hA(t) + h^2A(t)^2 + h^3A(t)^3 + \dots$$

für alle  $t \in I'_h$ . Der Rest des Beweises läuft wie bei Satz 3.  $\square$

Um den Satz von Gragg (vgl. [10], S.80) über die Existenz einer asymptotischen Entwicklung des globalen Fehlers

$$e_h(t) = x(t) - x_h(t), \quad t \in I_h \quad (26)$$

anwenden zu können, ist eine hinreichende Glattheit der Verfahrensfunktion  $\Phi(x, h)$  zu verifizieren.

**Lemma 2** *Unter den Voraussetzungen 1 und 2 ist die Verfahrensfunktion  $\Phi(x, h)$  auf  $S \times S \times [0, h_0]$   $r$ -mal stetig differenzierbar.*

*Beweis:* Wegen

$$\Phi(x, h) = \begin{pmatrix} \varphi(y, z, h) \\ \psi(y, z, h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [I - hf'(y)]^{-1}f(y) \\ I - hf'(y)^{-1}f(z) \end{pmatrix}$$

sind alle partiellen Ableitungen

$$\frac{\partial^{i+j+k}\varphi}{\partial y^i \partial z^j \partial h^k} \text{ bzw. } \frac{\partial^{i+j+k}\psi}{\partial y^i \partial z^j \partial h^k}$$

mit  $i + j + k \leq r$  zu bilden. Da  $f \in C^{r+1}(S)$  gilt, existieren diese Ableitungen und sind stetig, falls die Matrix  $E = I - hf'(y)$  regulär ist. Dies ist aber auf  $S \times S \times [0, h_0]$  wegen des Störungslemmas (s.o.) gesichert.  $\square$

**Folgerung 3** *Unter den Voraussetzungen 1, 2 und 3 gilt Lemma 2 auch mit der Ersetzung der Jacobimatrix  $f'(y)$  durch die Matrix  $A$ .*

Der *Beweis* verläuft wie bei Lemma 2.

Nach diesen Vorbereitungen läßt sich die Existenz einer asymptotischen  $h$ -Entwicklung des globalen Diskretisierungsfehlers (26) mittels des Satzes von Gragg nachweisen, den wir hier in der Form des Satzes 3.1.2 aus [10] benutzen. Da  $f \in C^r(S)$  wegen Voraussetzung 2 und  $\Phi \in C^r(S \times S \times [0, h_0])$  wegen des Lemmas 2 gilt, erhält man mittels des Satzes 3 nunmehr

**Satz 5** *Unter den Voraussetzungen 1 und 2 besitzt für  $h \in [0, h_0]$  und  $t \in I_h$  der globale Diskretisierungsfehler  $e_h(t)$  die Entwicklung*

$$e_h(t) = e_1(t)h + e_2(t)h^2 + \dots + e_{r-1}(t)h^{r-1} + E_r(t, h)h^r \quad (27)$$

mit  $M_r > 0$ , const. und  $\|E_r(t, h)\| \leq M_r \forall h \in [0, h_0]$ .  $\square$

Folglich besitzen die globalen Fehler beider Näherungslösungen  $y_h(t)$  und  $z_h(t)$  entsprechende Entwicklungen mit Gitterfunktionen  $e_k^y(t)$  und  $e_k^z(t)$  aus  $e_k(t)$  mit  $k = 1(1)r - 1$ . Die Funktionen  $e_k^y(t)$  und  $e_k^z(t)$  werden i. allg. voneinander verschieden sein; da sie bei der Extrapolation nicht explizit benötigt werden, ist dies jedoch unerheblich. Die Extrapolationsschritte können nun parallel für alle  $n + 1$  Näherungslösungen durchgeführt werden.

Falls die Jacobimatrizen  $f'(y_i)$  approximiert werden, kann man unter Benutzung des Satzes 4 und der Folgerung 3 den Satz 5 verallgemeinern.

**Folgerung 4** *Unter den Voraussetzungen 1, 2 und 3 existiert ein  $h_1 > 0$ , so daß für alle  $h \in [0, h_1]$  und  $t \in I_h$  der globale Diskretisierungsfehler des mit  $A(t)$  verallgemeinerten Verfahrens die asymptotische Entwicklung (27) besitzt.*  $\square$

Nachfolgend soll ein Schritt von  $t_i$  bis  $t_i + h$  mit dem extrapolierten SLIE-Verfahren ausgeführt werden. Sei dazu eine Schrittzahlfolge  $\{n_j\}$ ,  $j = 1, 2, \dots, r$ , z. B.  $\{n_j\} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots\}$  und eine entsprechende Schrittweitenfolge

$$h_j = h/n_j, \quad j = 1, 2, \dots, r \quad (28)$$

vorgegeben. Zuerst bestimme man die Jacobi-Matrix  $A := f'(x_i)$  oder eine geeignete Differenzenapproximation am Intervallanfang. Für  $j = 1(1)r - 1$  berechne man

$$E_j := I - h_j A,$$

setze den Startwert  $x^{(0)} := x_i$  und führe  $n_j$  Schritte mit dem SLIE-Verfahren mit derselben Matrix  $E_j$  aus, d.h.

$$E_j(x^{(k)} - x^{(k-1)}) = hf(x^{(k-1)}), \quad k = 1(1)n_j. \quad (29)$$

Dazu ist nur eine LU-Zerlegung von  $E_j$  erforderlich. Der Basiswert der Extrapolation

$$T_{j1} := x^{(n_j)} \quad (30)$$

stellt einen mit  $n_j$  SLIE-Verfahrensschritten berechneten Näherungsvektor für  $x(t_{i+1})$  dar und besitzt deshalb allgemein nach Folgerung 4 die asymptotische Entwicklung (27), hier in der Darstellung

$$T_{j1}(t) = x(t) + e_1(t)h + \dots + e_{r-1}(t)h^{r-1} + O(h^r). \quad (31)$$

Diese Entwicklung stellt die Grundlage für  $r - 1$  ausführbare Extrapolationsschritte dar. Diese werden nach der leicht herleitbaren Formel

$$T_{j,k+1} = T_{jk} + \frac{T_{jk} - T_{j-1,k}}{\left(\frac{n_j}{n_{j-k}}\right) - 1}, \quad j = k + 1(1)r, \quad k = 1(1)k - 1 \quad (32)$$

ausgeführt.  $T_{jk}$  repräsentiert dann Werte eines W-Verfahrens  $k$ -ter Ordnung.

Die Stabilitätsfunktionen  $R_{j,k}(\zeta)$  der Extrapolierten  $T_{jk}$  ergeben sich nach derselben Formel rekursiv für  $k = 1, 2, 3, \dots$

$$R_{j,k+1}(\zeta) = R_{jk}(\zeta) + \frac{R_{jk}(\zeta) - R_{j-1,k}(\zeta)}{\left(\frac{n_j}{n_{j-k}}\right) - 1}, \quad j = k + 1(1)r \quad (33)$$

Da die Stabilitätsfunktion

$$R_{j1}(\zeta) = \left(1 - \frac{\zeta}{n_j}\right)^{-n_j}$$

für das Grundverfahren mit der des gewöhnlichen impliziten Eulerverfahrens identisch ist, erhält man für  $T_{jk}$  dieselben Stabilitätsbereiche wie für das linear-implizite Eulerverfahren (vgl. [5], S. 151).

Die harmonische Unterteilungsfolge  $n_j = j$ ,  $j \in \mathbb{N}$  liefert (vgl. [4]) für  $\zeta \rightarrow \infty$

$$|R_{jk}(\zeta)| \sim \frac{1}{|\zeta|^{j-k+1}} \rightarrow 0,$$

womit  $R_{j1}$  und  $R_{j2}$  L-stabil und  $R_{jk}$  noch  $L(89.8^\circ)$ -stabil für  $j \leq k \leq 8$  sind.

## 4 Effizienzvergleich und Anwendung

Der Vorteil der simultanen Verfahren besteht offenbar in wesentlich kürzeren Rechenzeiten bei großdimensionalen Differentialgleichungs-Systemen. Nachfolgend werden die 4 arithmetischen Grundoperationen mit gleichem zeitlichen Gewicht versehen gezählt. (Zeitmessungen der Gleitpunkt-Arithmetik bei modernen PC ergaben gleiche Rechenzeiten für Addition, Subtraktion und Multiplikation; lediglich die - i.allg. weniger benutzte - Division wäre mit etwa 3-fachem Gewicht zu bewerten.)

Wir betrachten zuerst einen Integrationsschritt des linear-impliziten Eulerverfahrens (LIE)

$$(I - hf'(y_i))(y_{i+1} - y_i) = hf(y_i). \quad (34)$$

Der arithmetische Hauptaufwand setzt sich aus dem

- Funktionsaufwand zur Bestimmung von  $f(y_i)$  und  $f'(y_i)$  und dem
- algebraischen Aufwand zur LU-Zerlegung von  $E = I - hf'(y_i)$

zusammen.

## Annahmen

- (i) Die 4 arithmetischen Grundoperationen werden mit gleichem zeitlichen Gewicht gezählt.
- (ii) Für eine rechte Seite  $f_k(y)$ ,  $k = 1(1)n$ , werden  $r_k \geq 0$  arithmetische Operationen benötigt, womit der durchschnittliche Aufwand für eine rechte Seite  $r = \sum r_k/n$  beträgt.
- (iii)  $f'(y_i)$  wird durch Differenzen mit  $n + 1$  rechten Seiten approximiert.

Damit sind  $r \cdot n(n + 1)$  arithmetische Operationen für  $f(y_i)$  und  $f'(y_i)$  nötig. Zusammen mit den  $\frac{2}{3}n^3$  Operationen, die asymptotisch für die LU-Zerlegung gebraucht werden, ergibt sich für (34) der Wert  $\frac{2}{3}n^3 + rn(n + 1)$ .

Für die  $n + 1$  unabhängig zu lösenden DGL-Systeme ist diese Zahl mit  $(n + 1)$  zu multiplizieren, womit man für das ungekoppelte Verfahren

$$T_U(n) = \frac{2}{3}n^4 + r \cdot n^3 + O(n^3) \quad (35)$$

erhält. Eine genauere Analyse liefert übrigens die Darstellung

$$T_U(n) = \frac{2}{3}n^4 + \frac{25}{6}n^3 + rn(n + 1)^2 + O(n^2); \quad (36)$$

dabei enthalten die Ordnungsterme nicht die Variable  $r$ .

Offenbar wird das asymptotische Verhalten von  $T_U(n)$  wesentlich durch das Verhältnis von  $r$  und  $n$  bestimmt: Ist  $n \gg r$  (Fall 1), so dominiert der algebraische Aufwand der  $(n + 1)$  LU-Zerlegungen. Dieser Fall ist typisch für Semidiskretisierungen (z.B.  $n > 100$ ) bei relativ einfachen DGL-Systemen (z.B.  $r = 5$ ). Erreicht andererseits  $r$  die Größenordnung von  $n$  (Fall 2), insbesondere bei kleineren, aber komplizierten Systemen, so ist der Funktionsaufwand unbedingt zu berücksichtigen. Durch den Ansatz

$$r = \rho \cdot n, \quad \rho \geq 0, \text{ const.} \quad (37)$$

werden nachfolgend beide Fälle betrachtet ( $\rho \rightarrow 0$  für Fall 1,  $\rho \rightarrow \infty$  für Fall 2), womit (35) die allgemeine Darstellung

$$T_U(n) = \left(\frac{2}{3} + \rho\right)n^4 + O(n^3) \quad (38)$$

annimmt.

Betrachten wir nun einen Schritt des SLIE-Verfahrens. Das ungestörte System (34) erfordert



- (i)  $(n + 1)$  Berechnungen von  $f(y_i)$
- (ii)  $2n^2$  Operationen zur Approximation von  $f'(y_i)$
- (iii)  $2n$  Operationen für  $E = I - hf'(y_i)$
- (iv)  $\frac{2}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2$  Operationen für die LU-Zerlegung und
- (v)  $n^2$  Operationen für die Vorwärts-Rückwärts-Elimination,

so daß asymptotisch  $(\frac{2}{3}n^3 + \frac{7}{2}n^2)$  Operationen und  $(n + 1)$  Funktionsberechnungen nötig sind. Jedes gestörte System erfordert zusätzlich

- (i) 1 Berechnung von  $f(z_i)$  und
- (ii)  $n^2$  Operationen für die Vorwärts-Rückwärts-Elimination,

womit bei  $n$  gestörten Systemen  $n^3$  Operationen und  $n$  Funktionsberechnungen hinzukommen. Unter den Annahmen (i),(ii) und (iii) lautet zusammengefaßt der arithmetische Gesamtaufwand für einen Integrationsschritt des SLIE-Verfahrens

$$T_S(n) = \frac{5}{3}n^3 + \frac{7}{2}n^2 + rn \cdot (2n + 1) + O(n) \quad (39)$$

bzw. mittels (37)

$$T_S(n) = (\frac{5}{3} + 2\rho)n^3 + O(n^2) \quad (40)$$

Operationen.

Im Vergleich liefern (38) und (40) offenbar den Quotienten

$$\frac{T_U(n)}{T_S(n)} = \frac{2 + 3\rho}{5 + 6\rho} \cdot n + O(1). \quad (41)$$

Mit dem Faktor

$$\kappa(\rho) := \frac{2 + 3\rho}{5 + 6\rho}$$

gilt für  $\rho \geq 0$  die Einschließung  $0.4 \leq \kappa(\rho) < 0.5$ , womit

$$T_U(n) \approx \kappa(\rho) \cdot n \cdot T_S(n) \quad (42)$$

folgt, d.h. ein Rechenzeitgewinn um den Faktor  $0.4n$  durch das SLIE-Verfahren erwartet werden kann.

Nachfolgend wenden wir in beiden Verfahrensvarianten die Extrapolationsformel (32)  $(p - 1)$ -mal mit einer geeigneten Schrittzahl-Folge  $n_k$ ,  $k = 1(1)p$ , an. Es gelten die Annahmen (i), (ii), (iii) sowie die weitere natürliche

## Annahme

(iv) Die Schrittzahlfolge sei  $\{n_k\} = \{1, 2, 3, 4, \dots, p\}$ ; die Anzahl  $p - 1$  der Extrapolationen sei klein gegenüber der Dimension  $n$ .

Offenbar ist dann die Extrapolationsformel (32) genau  $(1 + 2 + 3 + \dots + (p - 1))$ -mal anzuwenden. Da in jedem Extrapolationsschritt wegen  $h_k = h/n_k$  und

$$E_k = I - h_k \cdot f'(y_i), \quad k = 1(1)p \quad (43)$$

genau eine LU-Zerlegung vorzunehmen ist, ist der dominante Term des algebraischen Aufwandes mit  $p$  zu multiplizieren, wogegen der dominante Term des Funktionsaufwandes (Jacobimatrix) unverändert bleibt.

Für das ungekoppelte Verfahren der Ordnung  $p \geq 1$  erhält man deshalb asymptotisch

$$T_U(n, p) = \frac{2}{3}pn^4 + \rho n^4 + O(n^3). \quad (44)$$

Die Analyse des simultanen Verfahrens mit Extrapolation muß dagegen detaillierter vorgenommen werden. Nachfolgend werden nur die dominanten Terme betrachtet. Analog zum Basisverfahren erhält man für das ungestörte System

- (i)  $(n + 1)$  Funktionsberechnungen für  $f(y)$  sowie
- (ii)  $p$  LU-Zerlegungen.

Jedes gestörte System erfordert pro Basis- und Extrapolationsschritt zusätzlich 1 Berechnung von  $f(z)$  und  $n^2$  Operationen für die Vorwärts-Rückwärts-Elimination, so daß insgesamt

- (i)  $\frac{1}{2}p(p + 1)n$  Berechnungen von  $f(z)$  sowie
- (ii)  $\frac{1}{2}p(p + 1)n \cdot n^2$  Operationen hinzukommen.

Unter Beachtung der Tatsache, daß eine  $f(y)$ -Berechnung  $rn$  arithmetische Operationen benötigt, erhält man

$$\begin{aligned} T_S(n, p) &= \frac{2}{3}pn^3 + rn^2 + \frac{1}{2}p(p + 1)n^3 + \frac{1}{2}p(p + 1)rn^2 + O(n^2) \\ &= \left(\frac{1}{2}p + \frac{7}{6}\right)pn^3 + \left(\frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}p + 1\right)rn^2 + O(n^2). \end{aligned}$$

Mit (37) ergibt sich hieraus schließlich

$$T_S(n, p) = \left(\frac{1}{2}p + \frac{7}{6}\right)pn^3 + \left(\frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}p + 1\right)\rho n^3 + O(n^2). \quad (45)$$

Tatsächlich verallgemeinern (44) und (45) die obigen Formeln des Basisschrittes ( $p = 1$ ). Für das Zeitverhältnis erhält man mit dem Faktor

$$\kappa(p, \rho) := \frac{\frac{2}{3}p + \rho}{\left(\frac{1}{2}p^2 + \frac{7}{6}p\right) + \left(\frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}p + 1\right) \rho} \quad (46)$$

folglich die Darstellung

$$T_U(n, p) = \kappa(p, \rho) \cdot n \cdot T_S(n, p). \quad (47)$$

Im Falle 1 ( $\rho = 0$ ) ergibt sich hieraus

$$T_U(n, p) \approx \frac{4}{3p + 7} n \cdot T_S(n, p), \quad (48)$$

so daß für einen Extrapolationsbereich  $1 \leq p \leq 11$  immerhin ein minimaler Faktor von  $0.1n$  verbleibt (vgl. Tabelle 1).

$\rho$ p	0	1.0	2.0	5.0	10.0	100.0
1	.4000	.4546	.4706	.4856	.4924	.4993
2	.3077	.2800	.2703	.2603	.2556	.2506
3	.2500	.2000	.1818	.1628	.1538	.1441
4	.2105	.1549	.1346	.1133	.1033	.0923
5	.1818	.1262	.1060	.0847	.0748	.0638
6	.1600	.1064	.0870	.0667	.0571	.0467
7	.1429	.0919	.0735	.0544	.0455	.0357
8	.1290	.0809	.0636	.0457	.0373	.0282
9	.1176	.0722	.0559	.0392	.0131	.0228
10	.1081	.0651	.0499	.0342	.0268	.0188
11	.1000	.0594	.0450	.0302	.0233	.0158

Tabelle 1: Faktoren  $\kappa(p, \rho)$  gemäß (46)

Im Falle 2 sehr aufwendiger Differentialgleichungen ( $\rho \rightarrow \infty$ ) entsteht

$$T_U(n, p) \approx \frac{2}{p^2 + p + 2} \cdot n \cdot T_S(n, p), \quad (49)$$

d.h. im Extrapolationsbereich  $1 \leq p \leq 11$

$$T_U(n, 11) \approx 0.015n \cdot T_S(n, 11).$$

Hier sind simultane Verfahren offenbar erst bei großdimensionalen DGL-Systemen konkurrenzfähig (vgl. Tabelle 1). Wegen der in praktischen Anwendungen stets auftretenden Dimensionen von  $n \geq 100$  und relativ niedrigen Extrapolationszahlen  $p$  ist das SLIE-Verfahren dennoch in jedem Falle die bessere Wahl.

### Anwendung: Nichtlineares elektrisches Netzwerk

Nichtlineare parametrisch erregte elektrische Netzwerke mit subharmonischer Reaktion lassen sich durch periodisch erregte Differentialgleichungen (vgl. [8])

$$\ddot{x} + \alpha \dot{x}^3 - \beta \dot{x} + (1 + B \sin 2t)x = 0 \quad (50)$$

mit Parametern

$$\begin{aligned} B &= 0.1 \\ \alpha &= \varepsilon - B = \varepsilon - 0.1 \\ \beta &= \frac{\varepsilon}{2} - B = \frac{\varepsilon}{2} - 0.1 \end{aligned}$$

beschreiben. Nach Transformation in Polarkoordinaten erhält man das DGL-System in Radius-Winkel-Koordinaten

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_1}{dt} &= \beta \cos \theta_1 \sin \theta_1 - \sin^2 \theta_1 - \alpha u^2 \sin^3 \theta_1 \cos \theta_1 - \\ &\quad -(1 + B \sin 2\theta_2) \cos^2 \theta_1 =: \omega(\theta_1, \theta_2, u) \\ \frac{d\theta_2}{dt} &= 1 \\ \frac{du}{dt} &= u(\cos \theta_1 \sin \theta_1 + \beta \sin^2 \theta_1) - \alpha u^3 \sin^4 \theta_1 - \\ &\quad -u(1 + B \sin 2\theta_2) \cos \theta_1 \sin \theta_1 =: r(\theta_1, \theta_2, u). \end{aligned} \quad (51)$$

Die Gleichung für den invarianten Torus wird folglich (vgl. [11]) durch die quasilineare DGL auf dem 2-Torus

$$\frac{\partial u}{\partial \theta_2} + \omega(\theta_1, \theta_2, u) \frac{\partial u}{\partial \theta_1} = r(\theta_1, \theta_2, u), \quad (\theta_1, \theta_2) \in \mathbb{T}^2 \quad (52)$$

beschrieben.

Während in [2] und [11] diese Gleichung auf dem 2-Torus mittels Volldiskretisierungen durch explizite und linear-implizite Upwind-Verfahren behandelt wird, führt eine Semidiskretisierung bezüglich der Variablen  $\theta_1$  mit  $J$  Teilintervallen auf eine großdimensionale Randwertaufgabe

$$\frac{du}{dt} = f(t, u), \quad u(0) = u(2\pi) \quad (53)$$

mit  $f : I = [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}^J$  für die Gitterfunktionen  $u_j(t) \sim u(\theta_{1,j}, t)$ . Die auftretenden Jacobimatrizen wurden stets durch Differenzenquotienten approximiert.

Für den Parameterwert  $\varepsilon = 1.5$  werden in Tabelle 2 die Rechenzeiten eines Integrationsschrittes dargestellt.  $n = J$  ist die Anzahl der bei Semidiskretisierung entstehenden Differentialgleichungen;  $p$  gibt die Konvergenzordnung (Zahl der ausgeführten Extrapolationen + 1) des linear-impliziten Eulerverfahrens (LIE) und des gekoppelten Verfahrens (SLIE) an.

$n$	$p = 4$		$p = 6$		$p = 8$		$p = 10$	
	SLIE	LIE	SLIE	LIE	SLIE	LIE	SLIE	LIE
25	0.05	0.11 <i>0.088</i>	0.10	0.19 <i>0.076</i>	0.15	0.27 <i>0.072</i>	0.23	0.37 <i>0.064</i>
50	0.20	0.94 <i>0.094</i>	0.42	1.51 <i>0.072</i>	0.70	2.14 <i>0.061</i>	1.10	2.86 <i>0.052</i>
100	1.10	12.3 <i>0.112</i>	2.26	19.1 <i>0.085</i>	3.85	26.0 <i>0.068</i>	5.80	33.4 <i>0.058</i>
200	7.30	192 <i>0.132</i>	15.1	293 <i>0.097</i>	26.0	372 <i>0.072</i>	38.3	481 <i>0.063</i>
400	63.0	– –	138	– –	230	– –	352	– –
$Q$ $O(\cdot)$	<i>8.63</i> $n^3$	<i>15.6</i> $n^4$	<i>9.14</i> $n^3$	<i>15.3</i> $n^4$	<i>8.85</i> $n^3$	<i>14.3</i> $n^4$	<i>9.19</i> $n^3$	<i>14.4</i> $n^4$

Tabelle 2: Rechenzeiten bei Dimension  $n$  und Ordnung  $p$  (in Sekunden)

Die berechneten Quotienten  $Q$  der Rechenzeiten

$$Q := T_S(400, p) / T_S(200, p) \quad \text{für simultanes Verfahren}$$

$$Q := T_U(200, p) / T_U(100, p) \quad \text{für ungekoppeltes Verfahren}$$

bestätigen die theoretischen Rechenzeitentwicklungen  $O(h^3)$  bzw.  $O(h^4)$  im wesentlichen. Die berechneten Werte der Faktoren

$$K(p, \rho) := \frac{T_U(n, p)}{n \cdot T_S(n, p)} \approx \kappa(p, \rho)$$

(Zahlen gesperrt dargestellt) ordnen das Problem gemäß Tabelle 1 als System mit mittlerem Funktionsaufwand ein.

Im absoluten Zeitvergleich erwies sich das gekoppelte Verfahren bei üblichen Diskretisierungswerten  $n \geq 200$  hier und in anderen Anwendungsrechnungen – auch nach mehreren Extrapolationsschritten bis zu hohen Verfahrensordnungen – etwa *um den Faktor 10 schneller* als das Standardverfahren.

## Literatur

- [1] BADER, G.; DEUFLHARD, P.: A semi-implicit mid-point rule for stiff systems of ordinary differential equations. Numer. Math. 41 (1983), 373-398.
- [2] Bernet, K.; Vogt, W.: Anwendung finiter Differenzenverfahren zur direkten Bestimmung invarianter Tori. ZAMM 74 (1994), No. 6, T577-T579.
- [3] DEUFLHARD, P.: Recent Progress in Extrapolation Methods. Numer. Math. 41 (1985), 505-535.
- [4] DEUFLHARD, P.; BORNEMANN, F.: Numerische Mathematik II. Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen. De Gruyter, Berlin New York 1994.
- [5] HAIRER, E.; WANNER, G.: Solving Ordinary Differential Equations II. Springer-Verlag, Berlin 1991.
- [6] KAPS, P.; OSTERMANN, A.: Rosenbrock Methods Using few LU-Decompositions. IMA J. Numer. Anal. 9 (1989), 15-27.
- [7] NOWAK, U.: Adaptive Linienmethoden für nichtlineare parabolische Systeme. Technical Report TR 93-14, 1993, ZIB, Berlin.
- [8] PHILIPPOW, E.S.; BÜNTIG, W.G.: Analyse nichtlinearer dynamischer Systeme der Elektrotechnik. Carl Hanser Verlag, München 1992.
- [9] STEIHAUG, T.; WOLFBRANDT, A.: An attempt to avoid exact Jacobian and nonlinear equations in the numerical solution of stiff ordinary differential equations. Math. Comp. 33 (1979), 521-534.
- [10] STREHMEL, K.; WEINER, R.: Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen. Teubner, Stuttgart 1995.
- [11] Vogt, W.; Bernet, K.: A Shooting Method for Invariant Tori. Preprint No. M 3/95, Technical University of Ilmenau, Department of Mathematics.